

Ю.А. РОМАНЮК, А.М. ЯРЕМКО, В.М. ДЖАГАН, В.О. ЮХИМЧУК

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 45, Київ 03028; e-mail: romanyuk_yu@ukr.net)

УДК 539

КОМБІНАЦІЙНЕ РОЗСІЮВАННЯ СВІТЛА В НАДГРАТКАХ З Ge КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

Проведено дослідження надґраток (НГ) з шарами Ge квантових точок (КТ) методом комбінаційного розсіювання світла (КРС) та запропоновано теоретичну модель, що описує експериментальні спектри. Модель враховує реальну кристалічну структуру КТ та навколишньої матриці, а також фонон-фононну взаємодію КТ з матрицею. Інтенсивності спектрів КРС розраховувалися з використанням процедури вторинного квантування та методу функцій Гріна. Отримані результати показали, що кристалічна структура надґратки, що складається з кремнієвих шарів та шарів з Ge квантовими точками, може бути описана як змішаний кристал з певним розподілом “домішок” (Ge-“молекул”). Продемонстровано якісну кореляцію в положенні та інтенсивності смуг у теоретично розрахованих та експериментально отриманих спектрах КРС від надґраток з шарами Ge (SiGe) квантових точок та пояснено дублетний характер смуг.

Ключові слова: квантова точка, надґратка, комбінаційне розсіювання світла, функція Гріна, фонони.

1. Вступ і постановка задачі

В останні два десятиріччя ведуться активні дослідження електронних та оптичних властивостей квантово-розмірних кристалічних структур, які створюють передумови для їх практичного застосування в ролі перспективних матеріалів сучасної нано- та оптоелектроніки [1–3]. Відомо, що при наближенні розмірів КТ до борівського радіуса екситону в них, їх фундаментальні властивості починають суттєво відрізнятися від характеристик об’ємних кристалів. Зважаючи на важливість розуміння фізичних процесів, що відбуваються в КТ та НГ, їх вже тривалий час вивчають як експериментально, так і теоретично [1–16].

У перших теоретичних роботах [4, 7] для опису експериментально отриманих спектрів КРС від НГ, які склалися з квантово-розмірних шарів,

брали за основу модель лінійного ланцюжка. Появу низки додаткових смуг в спектрах КРС в області акустичних коливань пояснювали за рахунок ефекту збільшення розміру елементарної комірки кристала. Цю модель було успішно застосовано для розрахунку дисперсійних співвідношень акустичних і оптичних фононів в НГ GaAs/AlAs і InAs/GaAs [6]. Чисельні розрахунки дисперсії фононних гілок (як акустичних, так і оптичних) для НГ були зроблені в роботі [5].

Поширення акустичних коливань в періодичному шаруватому середовищі було вперше розглянуто С.М. Ритовим [10]. В його моделі дисперсія акустичних фононів збігається з дисперсією, отриманою в рамках моделі лінійного ланцюжка для фононів у низькочастотній області спектра. Відмінність для високочастотних фононів пов’язана з нелінійністю дисперсії фононів в цій області. В роботах [12, 13] були зроблені більш складні теоретичні дослідження частотної залежності коливань

© Ю.А. РОМАНЮК, А.М. ЯРЕМКО, В.М. ДЖАГАН,
В.О. ЮХИМЧУК, 2015

в НГ від їх параметрів, проте коливання в таких структурах були описані макроскопічною моделлю, за допомогою періодичної зміни щільності середовища і його пружних констант.

З появою НГ з шарами КТ почалися інтенсивні дослідження їх властивостей [17–20]. Одним з перших досліджень в цьому напрямку була робота [17], де CdSe наносфери розглядалися в рамках класичної моделі, згідно з якою наносфера радіусом r і діелектричною проникністю ε знаходиться у матриці з проникністю ε_d . У роботах [18, 19] КТ розглядалися у вигляді сферичного однорідного середовища. Для опису коливань в цьому середовищі були використані рівняння Нав'є та застосовані спеціальні граничні умови. В результаті було отримано два типи коливань в КТ: сферичні та торсійні. Інший підхід до проблеми було запропоновано в роботі [20]. Автори цієї роботи вважали КТ однорідним циліндричним диском з перерізом, нормальним до осі у вигляді еліпса або круга. Згідно з їх моделлю КТ взаємодіють між собою через акустичні коливання [21, 25–29]. Розрахунки спектрів КРС були зроблені з використанням деформаційного потенціалу взаємодії між акустичними фононами і електронними станами, які локалізовані в КТ. На основі отриманих результатів автори цих робіт зробили висновок, що смуги в спектрах КРС пов'язані з інтерференцією розсіювання світла з різних шарів КТ в НГ.

Також теоретичний розгляд спектра оптичних фононів в КТ проводиться в рамках моделі валентних силових полів [22, 23]. Ця модель є емпіричною і дозволяє розраховувати частоти фононів у КТ, що складаються з декількох тисяч атомів. Для розрахунків, виконаних в рамках цієї моделі, необхідно використовувати великі масиви даних, що робить їх досить трудомісткими.

В роботі [24] для опису спектрів КРС при дослідженні НГ використовували модель діелектричного континууму, однак вона є макроскопічним наближенням.

Тому, незважаючи на велику кількість робіт, присвячених моделюванню спектрів КРС від надґраток з шарами КТ, проблема їх опису залишається актуальною. У нашому дослідженні ми будемо описувати експериментальні спектри КРС на мікроскопічному рівні, тобто буде врахована реальна атомна структура КТ і матриці. Враховуючи те, що значення сталих ґраток a для Ge і Si

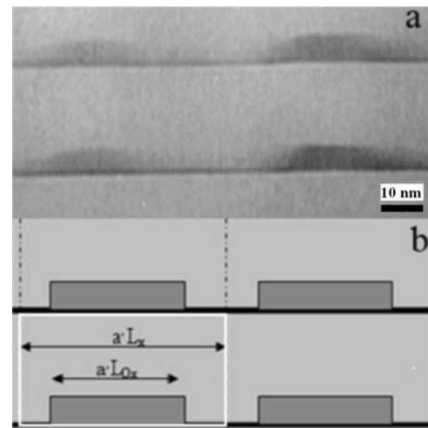


Рис. 1. ТЕМ-зображення Ge КТ точок в кремнієвій матриці (а), схема нової комірки в НГ з КТ (b): L_x – число старих елементарних комірок в новій елементарній комірці; L_{0x} – число старих елементарних комірок у КТ

є близькими (наприклад, для Ge/Si $\Delta a/a \sim 0,04$) і розміри КТ досить великі, $d \gg a$, можна увести нову комірку, яка включає в себе Ge КТ і, частково, навколишню Si матрицю, як показано на рис. 1. Ця нова елементарна комірка – досить велика за розмірами і складається з багатьох старих комірок як КТ, так і Si матриці. Приймаючи, що у нульовому наближенні сталі ґраток однакові, ми отримуємо новий кристал з іншим параметром ґратки, $a \rightarrow La$, $L = \{L_x, L_y, L_z\}$. Суттєво, при цьому, що приблизна рівність сталих ґраток Ge і Si означає один і той самий вектор оберненої ґратки $k = 2\pi/a$ для всієї кристалічної структури.

Дисперсійні криві акустичних фононів більшості матеріалів НГ перекриваються в досить широкій області частот, тому акустичні фонони з різних шарів поширюються вільно через всю кристалічну структуру. Нова періодичність кристала призводить до згортання дисперсійних фононних гілок в новій зоні Бріллюена. Якщо дисперсійні гілки оптичних фононів лежать в різних спектральних діапазонах, то оптичні фонони виявляються локалізованими всередині певного шару. У цьому випадку, оптичні фонони одного матеріалу не можуть поширюватися в шарах іншого матеріалу і швидко згасають на відстані одного-двох моношарів від межі поділу. Такі фонони не проявляють дисперсію в напрямку, нормальному до шарів наноструктури, і можуть бути представлені як стоячі хвилі, локалізовані всередині кожного шару.

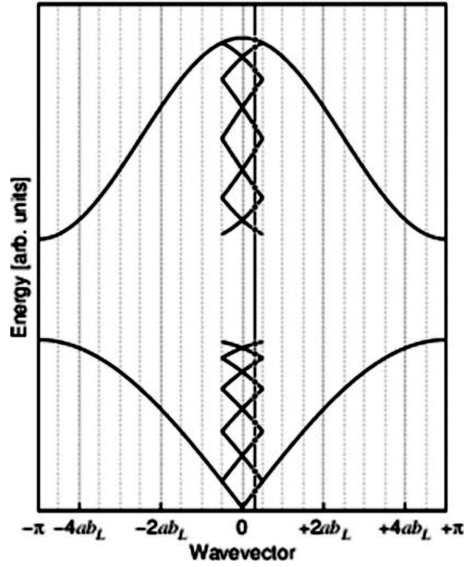


Рис. 2. Зміна дисперсії гілок фоновів при збільшенні сталої ґратки, $a \rightarrow aL$, (показано для $L = 10$)

Модель, запропонована в нашому дослідженні, дозволяє робити аналіз особливостей спектрів КРС для всіх типів фоновів у рамках мікроскопічного підходу, використовуючи тільки загальні параметри реальних кристалів (в тому числі частоти фоновів, атомні маси і сталі ґраток). Очевидно, що в НГ з КТ кількість оптичних фоновів зростає, оскільки новий вектор оберненої ґратки b_L , є меншим, ніж визначений в широкій зоні Брілюена (ЗБ), $b = 2\pi/a \rightarrow b_L = 2\pi/La$.

Тому кожна дисперсійна оптична гілка у широкій ЗБ перетворюється в декілька оптичних гілок у новій зоні, а кожна акустична гілка трансформується в одну акустичну гілку і декілька оптичних (рис. 2). Це призводить до появи в спектрі КРС, багатьох нових оптичних низькочастотних фоновів, які зумовлені утворенням великих кристалічних комірок. Необхідно відзначити, що дисперсія оптичних фоновів, як правило, мала, тому окремі нові компоненти в спектрі можуть не проявлятися, але фоновна смуга стане асиметричною, згідно з рис. 2, у низькочастотну сторону.

2. Теорія

2.1. Гамільтоніан кристала

Гамільтоніан кристала складається з кількох частин, які характеризують енергію електронної під-

системи, H_{el} , енергію коливань, H_{ph} , та енергію електрон-фоновної взаємодії, H_{el-ph} . В цій роботі ми розглядаємо процеси нерезонансного КРС, тому можна обмежитись тільки фоновною частиною гамільтоніана. В представленні вторинного квантування і гармонійному наближенні гамільтоніан можна записати таким чином:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\bar{q}, g, s_1} \omega_{\bar{q}+g, s_1} b_{\bar{q}+g, s_1}^+ b_{\bar{q}+g, s_1} + \\
 & + \sum_{\bar{q}, g, s_0} \omega_{\bar{q}+g, s_0} b_{\bar{q}+g, s_0}^+ b_{\bar{q}+g, s_0} - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_0, g', s'_0} \left[T_{\bar{q}}^{(0)}(g, g', s_0, s'_0) \delta_{g, g'} - \right. \\
 & - \Delta T_{\bar{q}}^{(0)}(g, g', s_0, s'_0) a_{(g'-g)}^{L_0} \left. \right] \pi_{-(g+\bar{q}), s_0} \pi_{-(g'+\bar{q}), s'_0}^+ - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_1, g', s'_1} \Delta T_{\bar{q}}^{(1)}(g, g', s_1, s'_1) a_{(g'-g)}^{L_0} \pi_{-(g+\bar{q}), s_1} \pi_{-(g'+\bar{q}), s'_1}^+ - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_0, g', s'_0} \left[\delta_{g, g'} L \bar{V}_{\bar{q}}(g, g', s_0, s'_0) - a_{g+\bar{q}}^{L_0} a_{g'+\bar{q}}^{*L_0} L V_{\bar{q}}(g, g', s_0, s'_0) \right] \times \\
 & \times \varphi_{g+\bar{q}, s_0} \varphi_{g'+\bar{q}, s'_0}^+ - \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_1, g', s'_1} \left[(a_{g+\bar{q}}^L - a_{g'+\bar{q}}^{L_0}) a_{g'+\bar{q}}^{*L_0} + \right. \\
 & + a_{g+\bar{q}}^{L_0} (a_{g'+\bar{q}}^{*L} - a_{g'+\bar{q}}^{*L_0}) + a_{g+\bar{q}}^{L_0} a_{g'+\bar{q}}^{*L_0} \left. \right] \times \\
 & \times L V_{\bar{q}}(g, g', s_1, s'_1) \varphi_{g+\bar{q}, s_1} \varphi_{g'+\bar{q}, s'_1}^+ + \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_1, g', s'_1} (a_{g+\bar{q}}^L - a_{g'+\bar{q}}^{L_0}) \times \\
 & \times a_{g'+\bar{q}}^{*L_0} L V_{\bar{q}}(g, g', s_1, s'_0) \varphi_{g+\bar{q}, s_1} \varphi_{g'+\bar{q}, s'_0}^+ + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}, g, s_1, g', s'_1} a_{g+\bar{q}}^{L_0} (a_{g'+\bar{q}}^{*L} - a_{g'+\bar{q}}^{*L_0}) \times \\
 & \times L V_{\bar{q}}(g, g', s_0, s'_1) \varphi_{g+\bar{q}, s_0} \varphi_{g'+\bar{q}, s'_1}^+. \tag{1}
 \end{aligned}$$

Гамільтоніан записаний в такій формі, що реальна кристалічна структура представлена як два віртуальні кристали Ge і Si, кожний об'ємом $V = v_0 N$, де v_0 і N об'єм і число елементарних комірок, відповідно [30]. Тому окремі доданки у виразі (1) відповідають такому: перші два доданки описують гамільтоніани обох кристалів, Si та Ge, що характеризуються індексами 1 і 0, відповідно; третій і четвертий доданки описують збудження, зумовлене кінетичною енергією кристалів, $T^{(0)}$, $\Delta T^{(0)}$ і $\Delta T^{(1)}$; останні чотири вирази пов'язані з потенціальною енергією реальної кристалічної структури, яку представлено як суму $V = V^{00} + V^{11} + (\Delta V^{00} + \Delta V^{11} + \Delta V^{10} + \Delta V^{01})$. В

операторах нормальних координат коливань ґратки, $\varphi_{q,s} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{q,s} + b_{-q,s}^+) = \varphi_{-q,s}^+$, та відповідних імпульсів, $\pi_{q,s} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{q,s}^+ - b_{-q,s}) = -\pi_{-q,s}^+$, хвильовий вектор виражений таким чином: $q = g + \tilde{q}$, де g – хвильовий вектор нової оберненої ґратки, а хвильовий вектор \tilde{q} змінюється в інших межах $(-\pi/aL_j \leq \tilde{q}_j \leq \pi/aL_j, j = x, y, z)$ в такій структурі. Фононні гілки при цьому нумеруються індексами $s_j = \{s_0, s_1\}$ для КТ і матриці відповідно; осцилюючі величини $a_{g+\tilde{q}}^{L_0} = \frac{L_0}{L} f_{g+\tilde{q}}^{L_0}$, де $f_{g+\tilde{q}}^{L_0} = \frac{1}{L_0} \sum_{n_0=1}^{L_0} \exp[i(\tilde{q} + b_g)n_0]$ залежать від розмірів КТ, тобто від числа “старих” комірок кристала, n_0 , що складають КТ.

2.2. Інтенсивність спектрів КРС і рівняння для функцій Гріна

Інтенсивність в спектрах КРС може бути виражена уявною частиною фур’є-компоненти запізнювальної функції Гріна (ФГ) від тензора розсіювання $\bar{\chi}_{k,\lambda,k',\lambda'}$ [30, 31, 32]:

$$I_{p',\lambda',p,\lambda} \sim -[1+n(\omega)] \text{Im} \langle \langle \bar{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}(t), \bar{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^+(0) \rangle \rangle_{\omega}, \quad (2)$$

$$\bar{\chi}_{k,\lambda,k',\lambda'} = \sum_{\alpha,\beta} \bar{e}_{\alpha}(k, \lambda) \bar{e}_{\beta}^*(k', \lambda') \chi_{\alpha,\beta}(Q = k' - k), \quad (3)$$

$$\chi_{\alpha,\beta}(Q) = \sum_{p,\gamma} \chi_{\alpha,\beta}(n) \exp(-iQn),$$

де $\bar{e}_{\alpha}(k, \lambda)$ і $\bar{e}_{\beta}(k', \lambda')$ – орти вектора електричного поля падаючого і розсіяного світла, відповідно. Можна показати, що для досліджуваної кристалічної структури з КТ тензор $\chi_{\alpha,\beta}(Q)$ має такий вигляд:

$$\chi_{\alpha,\beta}(Q) = \sqrt{LN_0} \left\{ \sum_{g,s_0} \tilde{\chi}_{\alpha,\beta}^{s_0}(b_g + Q) a_g^{L_0} \varphi_{g+Q,s_0} + \sum_{g,s_1} \tilde{\chi}_{\alpha,\beta}^{s_1}(b_g + Q) [\delta_{g,0} - a_g^{L_0}] \varphi_{g+Q,s_1} \right\}, \quad (4)$$

($N = LN_0$), де N_0 – число нових великих комірок.

З рівнянь (2)–(4) можна знайти спектральну залежність інтенсивності розсіювання світла, яка виражається через фур’є-компоненти ФГ від фононних операторів. Далі для спрощення розуміння розглядається випадок, коли тільки одна фононна гілка ($s_0 = \alpha_0$ і $s_1 = \alpha_1$) для кожного кристала Ge і Si є актуальною. Тоді інтенсивність розсіювання світла можна виразити таким чином:

$$I_{p',\lambda',p,\lambda}(\omega) \sim$$

$$\begin{aligned} & \sim -[1 + n(\omega)] \frac{1}{N} \text{Im} \left\{ \sum_g \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{\alpha_0}(b_g + Q) a_g^{L_0} \times \right. \\ & \times \sum_{g'} \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{*\alpha_0}(b_{g'} + Q) a_{g'}^{*L_0} \times \\ & \times \langle \langle \varphi_{g+Q,\alpha_0}(t); \varphi_{g'+Q,\alpha_0}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} + \\ & + \sum_g \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{\alpha_0}(b_g + Q) a_g^{L_0} \times \\ & \times \sum_{g'} \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{*\alpha_0}(b_{g'} + Q) [\delta_{g',0} - a_{g'}^{*L_0}] \times \\ & \times \langle \langle \varphi_{g+Q,\alpha_0}(t); \varphi_{g'+Q,\alpha_1}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} + \\ & + \sum_g \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{\alpha_1}(b_g + Q) [\delta_{g,0} - a_g^{L_0}] \times \\ & \times \sum_{g'} \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{*\alpha_0}(b_{g'} + Q) a_{g'}^{*L_0} \times \\ & \times \langle \langle \varphi_{g+Q,\alpha_1}(t); \varphi_{g'+Q,\alpha_0}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} + \\ & + \sum_g \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{\alpha_1}(b_g + Q) [\delta_{g,0} - a_g^{L_0}] \times \\ & \times \sum_{g'} \tilde{\chi}_{p',\lambda',p,\lambda}^{*\alpha_1}(b_{g'} + Q) [\delta_{g',0} - a_{g'}^{*L_0}] \times \\ & \left. \times \langle \langle \varphi_{g+Q,\alpha_1}(t); \varphi_{g'+Q,\alpha_1}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

Співвідношення (5) показує, що інтенсивність розсіювання світла виражається через компоненти Фур’є запізнюючої ФГ для фононних операторів типу $\varphi_{g+Q,s}$, де Q – хвильовий вектор падаючого випромінювання. Надалі ми будемо використовувати фононні оператори $\varphi_{p+k,\alpha}$, де $\alpha = \{\alpha_0, \alpha_1\}$ характеризують фононні гілки КТ і матриці, відповідно. ФГ описується таким виразом:

$$\langle \langle \varphi_{p+k,\alpha}(t); \varphi_{p'+k',\alpha}^+(0) \rangle \rangle = -i\Theta(t) \langle \langle [\varphi_{p+k,\alpha}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0)] \rangle \rangle, \quad (6)$$

де $\Theta(t)$ – ступінчата функція; вираз [...] – комутатор двох операторів; $\langle \dots \rangle$ означають статистичне усереднення операторів; $\varphi_{p+k,\alpha}(t) = \exp(iHt) \times \varphi_{p+k,\alpha} \exp(-iHt)$.

Рівняння для ФГ має такий вигляд:

$$\begin{aligned} & i \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle \varphi_{p+k,\alpha}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle = \\ & = \delta(t) \langle \langle [\varphi_{p+k,\alpha}(0); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0)] \rangle \rangle + \\ & + \langle \langle i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{p+k,\alpha}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle, \quad (7) \end{aligned}$$

де

$$\varphi_{-(p+k),\alpha} = \varphi_{p+k,\alpha}^+$$

а комутатор $[\varphi_{p+k,\alpha}(0); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0)] = 0$. Оскільки перший доданок у виразі (7) дорівнює нулю, то внесок у ФГ буде давати тільки останній.

Похідна від оператора залежить від гамільтоніана системи (1) і описується таким виразом:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{p+k,\alpha}(t) = [\varphi_{p+k,\alpha}; H_0 + \Delta H], \quad (8)$$

$$\alpha = \{\alpha_1, \alpha_0\},$$

в якому

$$H_0 = \sum_{\bar{q},g,\beta} \omega_{\bar{q}+g,\beta} b_{\bar{q}+g,\beta}^+ b_{\bar{q}+g,\beta}, \quad \beta = \{s_1, s_0\}. \quad (9)$$

Решта доданків у виразі (1) є збуренням, зумовленим неідеальністю початкового кристала, і вони приводять до системи зв'язаних між собою рівнянь для ФГ.

Надалі будемо вважати, як зазначалося вище, що КТ і матриця (тобто, кристали з матеріалу КТ і матриці) мають тільки по одній (оптичній чи акустичній) коливній моді, а сталі, які характеризують взаємодію між фононами гілки α і вектора $g+k$ та фононами сорту $\beta, p+k$, не залежать від хвильових векторів, $LV_k^{(\alpha,\beta)} = V^{\alpha,\beta}$.

Для аналізу рівнянь для ФГ введемо такі позначення:

$$G_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} = \sum_{g_1} a_{g_1+k}^{L_0} \langle \langle \varphi_{g_1+k,\alpha_0}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle_{\omega}, \quad (10a)$$

$$G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L-L_0} = \sum_{g_1} (a_{g_1+k}^L - a_{g_1+k}^{L_0}) \langle \langle \varphi_{g_1+k,\alpha_1}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle_{\omega}, \quad (10b)$$

$$G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} = \sum_{g_1} a_{g_1+k}^{L_0} \langle \langle \varphi_{g_1+k,\alpha_1}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle_{\omega}. \quad (10c)$$

Тоді два рівняння для фур'є-компонент ФГ запишуться у такому вигляді:

$$\langle \langle \varphi_{p+k,\alpha_0}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} = \frac{1}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_0)} \times$$

$$\times \left\{ \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0} \delta_{\alpha_0,\alpha'} \delta_{p+k,p'+k'} + \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0} a_{p+k}^{*L_0} \times \right. \\ \left. \times [V^{\alpha_0\alpha_0} G_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} + V^{\alpha_1\alpha_0} G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L-L_0}] \right\}, \quad (11a)$$

$$\langle \langle \varphi_{p+k,\alpha_1}(t); \varphi_{p'+k',\alpha'}^+(0) \rangle \rangle_{\omega} = \\ = \frac{1}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_1)} \{ \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_1} \delta_{\alpha_1,\alpha'} \delta_{p+k,p'+k'} - \\ - \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_1} [V^{\alpha_1\alpha_1} a_{p+k}^{*L} G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} - \\ - (a_{p+k}^{*L} - a_{p+k}^{*L_0}) V^{\alpha_0\alpha_1} G_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0}] \}. \quad (11b)$$

В рівняннях (11a), (11b) прийняті такі позначення:

$$\tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0} = \omega_{p+k,\alpha_0} a_0^{L_0}, \quad \Delta(\omega, p+k, \alpha_0) = \\ = \omega^2 - \eta_0 \omega_{p+k,\alpha_0} \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0}, \quad (\eta_0 \rightarrow 0), \quad (12a)$$

$$\tilde{\omega}_{p+k,\alpha_1} = \omega_{p+k,\alpha_1} (1 - a_0^{L_0}), \quad \Delta(\omega, p+k, \alpha_1) = \\ = \omega^2 - \eta_1 \omega_{p+k,\alpha_1} \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_1} \quad (\eta_1 = 1). \quad (12b)$$

Співвідношення (12a), (12b) дозволяють отримати систему рівнянь для всіх функцій (10a)–(10c). Помноживши (10a) на $a_{p+k}^{L_0}$ і просумувавши по індексу p , отримуємо:

$$G_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} [1 - f_{\alpha_0}^{L_0 L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0\alpha_0}] - \\ - G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L-L_0} f_{\alpha_1}^{L_0 L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1\alpha_0} = A_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0}, \quad (13)$$

де

$$f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, k) = \sum_p \frac{a_{p+k}^{L_0} a_{p+k}^{*L_0} \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0}}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_0)}, \quad (14a)$$

$$A_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} = \sum_p a_{p+k}^{L_0} \frac{\delta_{p,p'} \delta_{k,k'}}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_0)} \tilde{\omega}_{p+k,\alpha_0} \delta_{\alpha_0,\alpha'} = \\ = \frac{a_{p'+k'}^{L_0} \tilde{\omega}_{p'+k',\alpha_0}}{\Delta(\omega, p'+k', \alpha_0)} \delta_{\alpha_0,\alpha'} \delta_{k,k'}. \quad (14b)$$

З (11b) таким же чином можемо отримати інші два рівняння, що зв'язують між собою функції (10a)–(10c). Помножимо (11b) на фактори $a_{p+k}^{L_0}$ і $(a_{p+k}^L - a_{p+k}^{L_0})$ тоді, здійснивши підсумовування по p , отримуємо:

$$- G_{\alpha_0,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} f_{\alpha_1}^{L_0, L-L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0\alpha_1} + \\ + G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L-L_0} f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1\alpha_1} + G_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L_0} \times \\ \times [1 + f_{\alpha_0}^{L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1\alpha_1}] = A_{\alpha_1,k,\alpha',p'+k'}^{L_0}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
 & -G_{\alpha_0, k, \alpha', p'+k'}^{L_0} f_{\alpha_1}^{L-L_0, L-L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0 \alpha_1} + \\
 & + G_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L-L_0} [1 + f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1}] + \\
 & + G_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L_0} f_{\alpha_0}^{L-L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1} = \\
 & = A_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L-L_0}, \quad (16)
 \end{aligned}$$

$$f_{\alpha_0}^{L-L_0, L_0}(\omega, k) = \sum_p \frac{(a_{p+k}^L - a_{p+k}^{L_0}) a_{p+k}^{*L_0} \tilde{\omega}_{p+k, \alpha_0}}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_0)}, \quad (17a)$$

$$\begin{aligned}
 & f_{\alpha_0}^{L-L_0, L-L_0}(\omega, k) = \\
 & = \sum_p \frac{(a_{p+k}^L - a_{p+k}^{L_0})(a_{p+k}^{*L} - a_{p+k}^{*L_0}) \tilde{\omega}_{p+k, \alpha_0}}{\Delta(\omega, p+k, \alpha_0)}. \quad (17b)
 \end{aligned}$$

Зазначимо, що точний розв'язок системи рівнянь (13), (15) і (16) призводить до досить громіздких виразів. Для їх спрощення ми обмежимося в чисельнику і знаменнику лінійними членами по сталих взаємодії $V^{\alpha_1 \alpha_1}$ та $V^{\alpha_0 \alpha_0}$ і знехтуємо $V^{\alpha_1 \alpha_0}$ і $V^{\alpha_0 \alpha_1}$, як досить малими. Як результат, отримуємо

$$G_{\alpha_0, k, \alpha', p'+k'}^{L_0} = -\frac{a}{\Delta(\omega, k)} A_{\alpha_0, k, \alpha', p'+k'}^{L_0}, \quad (18a)$$

$$\begin{aligned}
 & G_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L-L_0} = \\
 & = \frac{1}{\Delta(\omega, k)} (b A_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L_0} - c A_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L-L_0}), \quad (18b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & G_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L_0} = \\
 & = \frac{1}{\Delta(\omega, k)} (d A_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L-L_0} - e A_{\alpha_1, k, \alpha', p'+k'}^{L_0}), \quad (18c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \Delta(\omega, k) = -\left[1 - f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0 \alpha_0} + \right. \\
 & \left. + f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1} + f_{\alpha_0}^{L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1}\right], \quad (19)
 \end{aligned}$$

де використані такі позначення:

$$a = 1 + f_{\alpha_0}^{L-L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1} + f_{\alpha_0}^{L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1},$$

$$b = f_{\alpha_0}^{L-L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1},$$

$$c = 1 + f_{\alpha_0}^{L_0, L}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1} + f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0 \alpha_0},$$

$$d = f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1},$$

$$e = [1 + f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_1 \alpha_1}] + f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, k) V^{\alpha_0 \alpha_0}.$$

Підставивши (18a)–(18c) і (19) у (11a), (11b) можна отримати вирази для фур'є-компонент відповідних ФГ. Результат розрахунку показує, що фур'є-компоненти ФГ, пропорційні $\delta_{k, k'}$, тому в такій кристалічній структурі виконується закон збереження хвильового вектора. Як відзначено у вступі до цієї роботи і показано на рис. 2, він змінюється в більш вузьких межах ($-\pi/aL_j \leq k_j \leq \pi/aL_j$). Крім того, зрозуміло, що в точці перетину дисперсійних кривих, $k_j=0$, повинно відбутися розщеплення цих кривих, які описують основні коливання, за рахунок відповідних ангармонійних членів.

3. Чисельні розрахунки і аналіз експериментальних результатів

Вирази для ФГ, підставлені у (5), дають можливість отримати спектральну залежність спектрів КРС як функцію частоти і параметрів кристала. Для спрощення виразу (5) і більшої зручності для чисельного моделювання будемо нехтувати залежністю від хвильового вектора в тензорі сприйнятливості, вважаючи $\tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{s_j}(b_g + Q) = \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{s_j}$ коли $k - k' = Q \rightarrow 0$.

Тоді інтенсивність КРС запишеться як сума чотирьох доданків:

$$\begin{aligned}
 & I_{p', \lambda', p, \lambda}(\omega) \sim -[1 + n(\omega)] \text{Im}\{I_{p', \lambda', p, \lambda}^{00} + \\
 & + I_{p', \lambda', p, \lambda}^{01} + I_{p', \lambda', p, \lambda}^{10} + I_{p', \lambda', p, \lambda}^{11}\}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 & I_{p', \lambda', p, \lambda}^{00} = \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{* \alpha_0} \{f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) + \\
 & + \frac{V^{\alpha_0, \alpha_0} a}{\Delta(\omega, Q)} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q)\}, \quad (21a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & I_{p', \lambda', p, \lambda}^{01} = \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{* \alpha_1} \frac{V^{\alpha_1, \alpha_0}}{\Delta(\omega, Q)} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \times \\
 & \times \left\{ \frac{(a_Q^L - a_Q^{L_0}) d \tilde{\omega}_{\alpha_1, Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} + \frac{a_{p'+k'}^{L_0} \tilde{\omega}_{p'+k', \alpha_1} e}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - \right. \\
 & \left. - f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, Q) d \right\}, \quad (21b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & I_{p', \lambda', p, \lambda}^{10} = \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{\alpha_1} \tilde{\chi}_{k', \lambda', k, \lambda}^{* \alpha_0} \frac{V^{\alpha_0, \alpha_1}}{\Delta(\omega, Q)} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \times \\
 & \times \left\{ \frac{(a_Q^{L_0} - a_Q^{*L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1, Q} a}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - f_{\alpha_1}^{L_0, L-L_0}(\omega, Q) \right\}, \quad (21c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_{p',\lambda',p,\lambda}^{11} &= \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_1} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_1} \left(\frac{[1 - a_0^{L_0} - a_0^{*L_0}] \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} + \right. \\
 &+ f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) - \frac{V^{\alpha_1, \alpha_1}}{\Delta(\omega, Q)} \left\{ \frac{\tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} \times \right. \\
 &\times \left[a_Q^{*L_0} \left(\frac{b(a_Q^L - a_Q^{L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - b f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, Q) \right) + \right. \\
 &+ a_Q^{*L_0} \left(\frac{ca_Q^{L_0} \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - c f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \right) + \\
 &a_Q^{*L} \left(\frac{ea_Q^{L_0} \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - e f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) + \right. \\
 &+ \left. \left. \left(\frac{d(a_Q^L - a_Q^{L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - d f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, Q) \right) \right] - \right. \\
 &- \left[f_{\alpha_1}^{L_0, L_0} \left(\frac{b(a_Q^L - a_Q^{L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - b f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, Q) \right) + \right. \\
 &+ f_{\alpha_1}^{L_0, L_0} \left(\frac{ca_Q^{L_0} \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - c f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \right) - \\
 &- f_{\alpha_1}^{L_0, L} \left(\frac{ea_Q^{L_0} \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - e f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \right) + \\
 &+ \left. \left. \left. f_{\alpha_1}^{L_0, L} \left(\frac{d(a_Q^L - a_Q^{L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} - d f_{\alpha_1}^{L-L_0, L_0}(\omega, Q) \right) \right] \right\} \right). \quad (21d)
 \end{aligned}$$

Приведена формула для інтенсивності КРС більш точна, в порівнянні з формулою, наведеною в нашій роботі [30], та враховує внесок доданків V^{α_1, α_1} та V^{α_0, α_0} , оскільки вони включені не тільки в сталі величини виразів (18а)–(19), а і в знаменник $\Delta(\omega, Q)$. У виразі (20) можна відзначити деякі граничні випадки:

а) якщо константи взаємодії V^{α_0, α_0} , V^{α_1, α_1} між фононами гілок малі, то (20) зводиться до більш простого вигляду, а інтенсивність, як і в [30] описується двома такими виразами:

$$\begin{aligned}
 I_{p',\lambda',p,\lambda}^{00} + I_{p',\lambda',p,\lambda}^{11} &= \\
 &= \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_0} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) + \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_1} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_1} \times \\
 &\times \left[\frac{(1 - a_0^{L_0} - a_0^{*L_0}) \tilde{\omega}_{\alpha_1,Q}}{\Delta(\omega, Q, \alpha_1)} + f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q) \right], \quad (22a)
 \end{aligned}$$

б) якщо $V^{\alpha_0, \alpha_0} \gg V^{\alpha_1, \alpha_1}$, то інтенсивність розсіювання описується рівнянням, аналогічним рівнянню (22а), але перший доданок в (22а) змінюється і, відповідно до (20) дорівнює:

$$\begin{aligned}
 I_{p',\lambda',p,\lambda}^{00} &= \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_0} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q) / \\
 &/ [1 - V^{\alpha_0, \alpha_0} f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q)] = \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_0} \times \\
 &\times \frac{\sum_p a_{p+Q}^{L_0} a_{p+Q}^{L_0} \tilde{\omega}_{p+Q, \alpha_0}}{\omega^2 - V^{\alpha_0, \alpha_0} \sum_p a_{p+Q}^{L_0} a_{p+Q}^{*L_0} \tilde{\omega}_{p+Q, \alpha_0}}, \quad (22b)
 \end{aligned}$$

в) якщо розмір КТ є близьким до розмірів нової комірки кристала, $L_0 \rightarrow L$, отримуємо

$$I_{p',\lambda',p,\lambda}^{00} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{\alpha_0} \tilde{\chi}_{k',\lambda',k,\lambda}^{*\alpha_0} \frac{\omega_{Q, \alpha_0}}{\omega^2 - \omega_{Q, \alpha_0}^2}, \quad (22c)$$

г) якщо $L_0 \rightarrow 0$ то у (21а)–(21д), (22а), (22б) всі доданки, які пропорційні $a_{g+Q}^{L_0} \rightarrow 0$, зникають і тільки той, що відповідає матриці (другий доданок у (22а)), зберігається.

Важливо відзначити, що отримані співвідношення для інтенсивності КРС можуть описувати процеси за участю як акустичних, так і оптичних фононів. Закономірності розсіювання залежать від характеру дисперсії фононних гілок. Надалі в роботі ми проаналізуємо результати чисельних розрахунків тільки для розсіювання світла на фононах, отриманих в результаті згортки гілки акустичних фононів і порівняємо ці результати з даними експерименту.

Інтенсивність розсіювання спектрів КРС, як видно з (21а)–(21д), (22а), (22б) залежить від функцій типу $f_{\alpha_0}^{L_0, L_0}(\omega, Q)$, $f_{\alpha_1}^{L_0, L_0}(\omega, Q)$ і має резонанс (12а), (12б) біля деякого значення частоти, що входить в $\Delta(\omega, g + Q, \alpha) = \omega^2 - \eta \omega_{g+Q, \alpha} \tilde{\omega}_{g+Q, \alpha}$. Розміри Ge квантових точок НГ задовольняють умові $L_x, L_y \gg L_z$, тому, як показано в Додатку 1 нашої роботи [30], тільки z координата у функціях $f_{\alpha_j}^{L_0, L_0}(\omega, Q)$ є суттєвою. Для акустичних фононів гілки об'ємного кристала можна добре описати виразом $\omega_{g+Q, \alpha} = \left| \omega_{0, \alpha} \sin \left[\frac{\alpha(b_{z, g+Q, z})}{2} \right] \right|$, де a – стала ґратки, Q – хвильовий вектор світла і g – новий вектор оберненої ґратки $b_{z, g} = \frac{2\pi}{aL_z} g_{z, i}$, $-\frac{L_z}{2} \leq g_{z, i} \leq \frac{L_z}{2}$, $g_{z, i} = 0, \pm 1, \pm 2$. Якщо знехтувати хвильовим вектором світла, $Q \rightarrow 0$, пік резонансу (22а) повинен припадати на значення $g_{z, i}$. Як видно з рис. 3, b , для $\pm g_{z, i}$ і $Q \rightarrow 0$ положення та

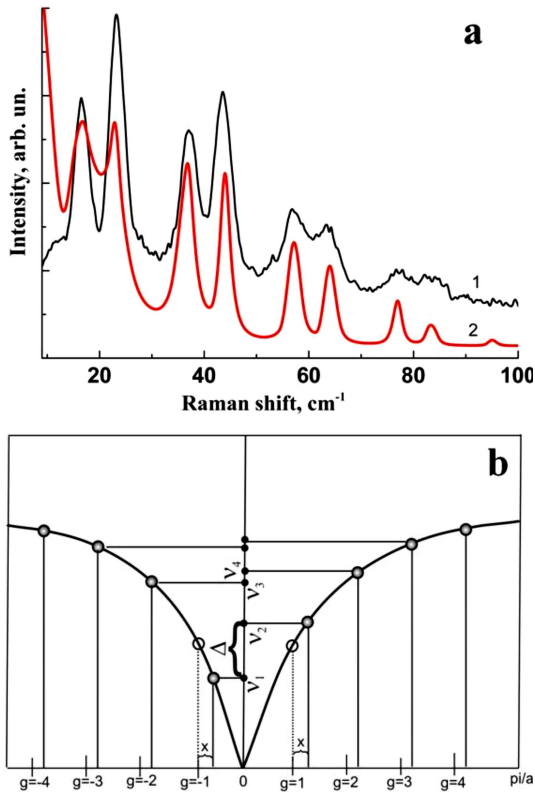


Рис. 3. Експериментальний спектр КРС (1) багатошарової структури з Ge КТ і, відповідний теоретичний спектр (2), що був розрахований на основі запропонованої моделі (а) підгоночні параметри: $V^{\alpha_1\alpha_1} = V^{\alpha_0\alpha_0} = 4 \text{ cm}^{-1}$; схематичне пояснення утворення дублетів в спектрах КРС (b)

інтенсивність обох піків повинні бути однаковими. Але, якщо $Q \neq 0$, положення та інтенсивність двох піків, описаних вище, будуть відрізнятися. Дійсно, $(\pm b_{z,g} + Q_z) = \frac{2\pi}{aL_z} (\pm g_{z,i} + \frac{aL_z n}{\lambda})$ і для великих L_z або показника заломлення n внесок другого доданка в дужках буде значним, тому в цьому випадку в спектрі, замість однієї смуги повинні спостерігатися дублети смуг. Це добре видно на рис. 3, b. Розщеплення в дублеті залежить від параметрів λ , L_z і n . Аналіз деяких випадків при чисельному моделюванні і порівняння з експериментальними результатами при зміні основних параметрів наведено на рис. 3–5.

На рис. 3, a показано експериментальний (крива 1) і розрахований (крива 2) спектри КРС на 10-шаровій НГ з Ge КТ. Видно, що інтенсивності дублетів і частотні положення смуг добре описуються теоретичним спектром. Інші теоретичні криві

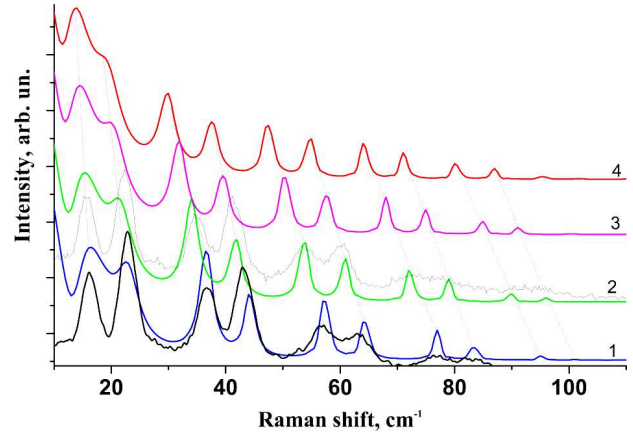


Рис. 4. Ряд теоретичних спектрів багатошарової структури з КТ, для яких висота КТ вважалася сталою (1,5 нм), а товщина Si шару варіювалася від 10 (крива 1) до 16 нм (крива 4). Для порівняння для перших двох спектрів наведено експериментальні спектри КРС

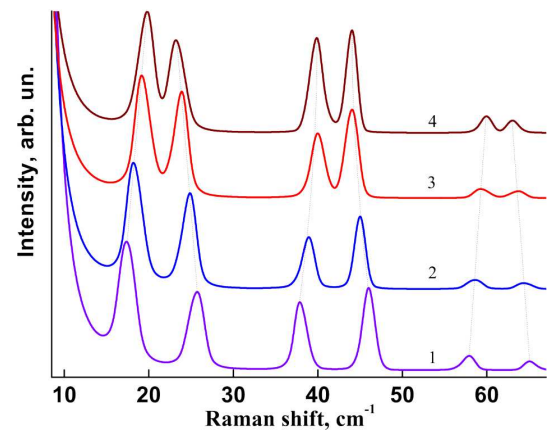


Рис. 5. Ряд теоретичних спектрів КРС у багатошарових структурах з КТ, отриманих при сталій висоті КТ і товщині шару Si та при варіюванні довжини хвилі збуджуючого випромінювання: 350 нм (1), 450 нм (2), 650 нм (3), 750 нм (4)

на рис. 4 демонструють вплив товщини шару Si (при однакових інших параметрах НГ). При збільшенні товщини шару від 10 до 16 нм, центр ваги спектра зміщується в бік менших частот і незначно збільшує відстань між смугами всередині дублета. Такі зміни в спектрах пояснюються в рамках запропонованої моделі збільшенням значення L_z і, отже, пов'язані зі збільшенням числа точок перегину дисперсійної кривої (рис. 2). Таким чином, при одній і тій самій довжині хвилі збуджуючого лазерного випромінювання, яка відповідає фо-

нонам з аналогічними хвильовими векторами, частоти відповідних смуг у спектрі змінюються відповідно до змін дисперсійної кривої.

Ефект зміни довжини хвилі збуджуючого випромінювання ($\lambda_{\text{exc.}}$) показаний на рис. 5. Як видно, при зміні енергії збудження з 1,65 еВ ($\lambda_{\text{exc.}} = 750$ нм) до 3,55 еВ ($\lambda_{\text{exc.}} = 350$ нм) відстань між смугами всередині дублету зменшується при сталому положенні центра дублету. Необхідно відзначити, що найкраща підгонка теоретичних спектрів до експериментальних має місце при досить малих значеннях сталих взаємодії, $V^{\alpha_0, \alpha_0} / \omega_{\alpha_0}$, $V^{\alpha_1, \alpha_1} / \omega_{\alpha_1} \leq 0,05$.

Необхідно також відзначити, як було нами показано в роботах [34, 35], що реальні КТ мають змішаний SiGe склад, що зумовлено гігантською інтердифузєю Si з кремнієвої підкладки за рахунок неоднорідних напружень поблизу КТ. Оцінити компонентний склад КТ можна із спектрів КРС на оптичних фононах. Дійсно, частоти Ge-Ge, Si-Ge та Si-Si мод в SiGe твердому розчині суттєво залежать від вмісту кожного з компонентів. Врахування ефекту компонентного перемішування дозволяє більш точно описувати спектри КРС на згортках дисперсійних гілок акустичних фононів.

4. Висновки

Виконано теоретичне моделювання експериментально отриманих спектрів КРС в багатопарових структурах з квантовими точками. Показано, що у теоретичному описі спектрів КРС (або поглинання) таких структур, повинно бути прийнято до уваги збільшення кількості фононних мод. Запропоновано модель для опису експериментальних спектрів КРС вказаних вище структур, яка враховує реальну кристалічну структуру як КТ, так і навколишньої матриці, а також взаємодію коливань КТ з фононами матриці. За допомогою процедури вторинного квантування і методу функцій Гріна, розраховано спектральну залежність інтенсивності спектрів КРС. Отримані результати показують, що кристалічні структури надгіраток з квантовими точками можуть бути описані як змішані кристали з певним розподілом домішок, організованих у великі "Ge молекули" (КТ). Показано, що при певних значеннях параметрів НГ спостерігається якісна кореляція в положенні та інтенсивності смуг між теоретичним та експеримен-

тальним спектрами КРС, та пояснено виникнення характерних дублетів смуг.

Автори вдячні О.В. Новікову (ІФМ РАН) за надані зразки для досліджень.

1. K.L. Wang, D. Cha, J. Liu, and C. Chen, Proc. IEEE **95**, 1866 (2007).
2. D.H. Feng, Z.Z. Xu, T.Q. Jia, X.X. Li, and S.Q. Gong, Phys. Rev. B **68**, 035334 (2003).
3. E. Finkman, N. Shuall, A. Vardi, V. Le Thanh, and S.E. Schacham, J. Appl. Phys. **103**, 093114 (2008).
4. A.S. Barker, Jr., J.L. Merz, and A.C. Gossard, Phys. Rev. B **17**, 3181 (1978).
5. Sung-kit Yip and Yia-Chung Chang, Phys. Rev. B **30**, 7037 (1984).
6. C. Colvard, R. Merlin, M.V. Klein, and A.C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **45**, 298 (1980).
7. B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O.H Duparc, R.E. Camely, and A.A. Maradudin, Phys. Rev. B **28**, 1711 (1983).
8. B. Jusserand, D. Paquet, F. Mollot, F. Alexandre, and G. Le Roux, Phys. Rev. B **35**, 2808 (1987).
9. J. Zi, K. Zhang, and X. Xie, Progr. Surf. Sci. **54**, 69 (1997).
10. С.М. Пітов, Акуст. Ж. **2**, 71 (1956).
11. P.A. Knipp and T.L. Reinecke, Phys. Rev. B **46**, 10 310 (1992).
12. A.K. Sood, J. Menendez, M. Cardona, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **54**, 2111 (1985).
13. V.I. Belitsky, T. Ruf, J. Spitzer, and M. Cardona, Phys. Rev. B **49**, 8263 (1994).
14. A.J. Shields, M. Cardona, and K. Eberl, Phys. Rev. Lett. **72**, 412 (1994).
15. M. Grundmann, O. Steir, and D. Bimberg. Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).
16. K. Yip and Y.-C. Chang, Phys. Rev. B **30**, 7037 (1984).
17. M.C. Klein, F. Hache, D. Ricard, and C. Flytzanis, Phys. Rev. B **42**, 11123 (1990).
18. E. Duval, Phys. Rev. B **46**, 5795 (1992).
19. C. Trallero-Giner, A. Debernardi, M. Cardona, E. Menendez-Proupin, and A.I. Ekimov, Phys. Rev. B **57**, 4664 (1998).
20. M. Cazayous, J.R. Huntzinger, J. Groenen, A. Mlayah, S. Christiansen, H.P. Strunk, O.G. Schmidt, and K. Eberl, Phys. Rev. B **62**, 7243 (2000).
21. M. Cazayous, J. Groenen, J.R. Huntzinger, A. Mlayah, and O.G. Schmidt, Phys. Rev. B **64**, 033306 (2001).
22. H. Fu, V. Ozolins, and A. Zunger, Phys. Rev. B **59**, 2881 (1999).
23. S.-F. Ren, Z.-Q. Gu, and D. Lu, Solid State Commun. **113**, 273 (2000).
24. M.I. Vasilevskiy, Phys. Rev. B **66**, 195326 (2002).
25. M. Cazayous, J. Groenen, A. Zwick, A. Mlayah, R. Carles, J.L. Bischoff, and D. Dentel, Phys. Rev. B **66**, 195320 (2002).

26. A.G. Milekhin, A.I. Nikiforov, O.G. Pchelyakov, S. Schulze, and D.R.T. Zahn, *Nanotechnology* **13**, 55 (2002).
27. P.D. Lacharme, A. Bernardi, A.R. Goni, M.I. Alonso, M. Garriga, N.D. Lanzillotti-Kimura, and A. Fainstein, *Phys. Rev. B* **76**, 155311 (2007).
28. G. Zanelatto, Yu.A. Pusep, N.T. Moshegov, A.I. Toropov, P. Basmaji, and J.C. Galzerani, *J. Appl. Phys.* **86**, 4387 (1999).
29. J.R. Hutter, A. Mlayah, V. Paillard, A. Wellner, N. Combe, and C. Bonafos, *Phys. Rev. B* **74**, 115308 (2006).
30. V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan, A.M. Yaremko, and M.Ya. Valakh, *Eur. Phys. J. B* **74**, 10 (2010).
31. H.J. Benson and D.L. Mills, *Phys. Rev. B* **1**, 4835 (1970).
32. A.M. Yaremko, V.V. Koroteev, V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan, H. Ratajczak, A.J. Barnes, and B. Silvi, *Chem. Phys.* **388**, 57 (2011).
33. Z.F. Krasilnik, P.M. Lytvyn, D.N. Lobanov, N. Mestres, A.V. Novikov, J. Pascual, M.Ya. Valakh, and V.A. Yukhymchuk, *Nanotechnology* **13**, 81 (2002).
34. M.Ya. Valakh, V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan, O.S. Lytvyn, A.G. Milekhin, A.I. Nikiforov, O.P. Pchelyakov, F. Alsina, and J. Pascual, *Nanotechnology* **16**, 1464 (2005).

Одержано 04.03.15

*Ю.А. Романюк, А.М. Яремко,
В.Н. Джаган, В.О. Юхимчук*

КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА В СВЕРХРЕШЕТКАХ С Ge КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

Резюме

Проведено исследование сверхрешеток (СР) со слоями Ge квантовых точек (КТ) методом комбинационного рассеяния света (КРС) и предложена теоретическая модель, описывающая экспериментальные спектры. Модель учитывает реальную кристаллическую структуру КТ и окружающей

матрицы, а также фонон-фононное взаимодействие КТ с матрицей. Интенсивности спектров КРС рассчитывались с использованием процедуры вторичного квантования и метода функций Грина. Полученные результаты показали, что кристаллическая структура сверхрешетки, состоящая из кремниевых слоев и слоев с Ge квантовыми точками, может быть описана как смешанный кристалл с определенным распределением “примесей” (Ge-“молекул”). Продемонстрирована качественная корреляция положения и интенсивности полос в теоретически рассчитанных и экспериментально полученных спектрах КРС от сверхрешеток со слоями Ge (SiGe) квантовых точек и объяснен дублетный характер полос.

*Yu.A. Romanyuk, A.M. Yaremko,
V.M. Dzhagan, V.O. Yukhymchuk*

RAMAN SCATTERING IN SUPERLATTICES WITH Ge QUANTUM DOTS

Summary

The studies of the Raman scattering in superlattices with layers of Ge quantum dots (QDs) are carried out. A theoretical model describing the experimental spectra with regard for the real crystal structures of both the QD and the surrounding matrix, as well as the phonon-phonon interaction in the matrix and in the QDs, is proposed. The intensities of Raman spectra are calculated with the use of the secondary quantization procedure and Green's functions. The results obtained show that the crystal structure of the superlattice composed of alternating silicon layers and layers with Ge quantum dots can be described as a mixed crystal consisting of a matrix with a certain distribution of “impurities” (“Ge-molecules”). A qualitative correlation between the theoretically calculated and experimentally measured positions and intensities of bands in the Raman spectra of QD superlattices is demonstrated, and the doublet character of the bands is explained.